

высокотемпературных воздействиях, коэффициент объемного роста при превращении Al в Al_2O_3 составил $\sim 1,44-1,46$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Шиманович, Д. Л. Электрохимические приемы формирования свободных наноструктурированных матриц из анодного Al_2O_3 со сквозными модифицированными порами: сб. докладов VII Всероссийской конференции молодых ученых «Наноэлектроника, нанопотоника и нелинейная физика» / Д. Л. Шиманович, Д. И. Чушкова, В. А. Сокол. 24-26 сентября 2012. Саратов. 2012. С. 188.
2. Сокол, В. А. Анодные оксиды алюминия. Мн.: Бестпринт. 2011. 431 с.
3. Сокол, В. А. Особенности применения пористых оксидов алюминия. / В. А. Сокол, В. А. Яковцева, Д. Л. Шиманович // Доклады БГУИР. 2012. №2 (64). С. 21.
4. Шиманович, Д. Л. Наномембранные структуры на основе модифицированного пористого оксида алюминия с отсутствием барьерного слоя: сб. докладов Всероссийской молодежной конференции «Химия поверхности и нанотехнология» / Д. Л. Шиманович, Д. И. Чушкова, В. А. Сокол. 10-11 октября 2012. Казань. 2012. С. 59.
5. Шиманович, Д. Л. Мембранные сенсорные элементы из нанопористого оксида алюминия для контроля относительной влажности: сб. материалов V международной научной конференции «Материалы и структуры современной электроники» / Д. Л. Шиманович, Д. И. Чушкова, В. А. Сокол. 10-11 октября 2012. Минск. 2012. С. 202.

К МОДЕЛИРОВАНИЮ ТЕХНОЛОГИИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ МИНИАТЮРНЫХ КРЕМНИЕВЫХ ПРИБОРОВ

А. В. Юхневич, И. А. Майер, А. Е. Усенко

НИИ физико-химических проблем Белгосуниверситета (НИИ ФХП БГУ), yukhnevich@bsu.by

Процесс химического растворения кристалла – ключевой этап в технологиях изготовления многих современных и перспективных кремниевых миниатюрных приборов. Однако ряд принципиальных научных и технических вопросов, связанных с данным процессом, остается пока без ответа, что затрудняет его совершенствование и рациональное техническое применение. Одним из перспективных путей изучения деталей этого процесса является его компьютерное моделирование на атомном уровне [1]. Сравнительный анализ результатов такого моделирования с результатами соответствующих натурных экспериментов позволяет уточнить природу элементарных стадий процесса и наметить пути совершенствования производственных технологий.

В НИИ ФХП БГУ экспериментально и теоретически изучаются особенности маскированного растворения монокристаллического кремния с целью совершенствования технологии изготовления кремниевых микро-/нано-приборов. Разработан ряд оригинальных компьютерных программ *Diamond*, предназначенных для моделирования на атомном уровне растворения кристаллов типа алмаза [2 – 4].

Эксперименты с данными моделями показали, что они способны отображать основные особенности растворения на макро- и микро-метровом уровне размеров. Однако для адекватного моделирования процесса на атомном уровне требуется их совершенствование. В частности, было показано, что они не позволяют моделировать формирование совершенных поверхностей с кристаллографической ориентацией типа (001). Именно такие поверхности являются предпочтительными элементами микро-/нано-деталей многих миниатюрных приборов, например, в МЭМС и НЭМС.

В статье приведено описание новой компьютерной программы – модели растворения кристаллов типа алмаза *Diamond-4* (кинетический Монте-Карло-алгоритм, *Borland C++ Builder*). В ней учтено влияние непрямых соседей на вероятность реализации элементарного акта процесса – удаления одного поверхностного атома. Как и в предыдущих наших моделях, в *Diamond-4* все физико-химические особенности элементарного акта и процесса в целом определяются набором значений вероятности удаления поверхностных атомов различных типов. Тип поверхностного атома обозначается тройкой чисел (f, ds, ns), где f – число первых соседей (связность атома), ds – число его прямых вторых соседей, ns – число непрямых вторых соседей. Всего поверхность рассматриваемых кристаллов может включать атомы 129 различных типов: 40 односвязных, 49 двухсвязных и 40 типов трехсвязных. Атомам каждого типа приписывается вероятность удаления, соответствующая энергии их связи с кристаллом и особенностям взаимодействия с растворителем.

Работа программы в компьютерном эксперименте заключается в выполнении заданного числа циклов, каждый из которых соответствует элементарному акту процесса растворения. Он включает выбор и удаление конкретного атома, а также расчет изменений типа соседей удаленного, предполагая сохранение тетраэдрической координации атомов при «растворении». Выбор атома на удаление осуществляется случайным образом с использованием случайного числа при учете принятого набора вероятностей и чисел атомов каждого типа, имеющихся к моменту реализации цикла. Параметрами являются: числа атомов всех 129 типов на исходной поверхности (характеристика ее микро-/нано-рельефа), общее число атомов, удаляемых в эксперименте, и набор ($P_1 - P_{129}$) всех значений вероятности удаления атомов различных типов. Результат работы программы – изображение травленной поверхности с атомным разрешением. На нем отображаются только поверхностные атомы и первый слой атомов объема кристалла. Имеется возможность выделения атомов различных типов заданными цветами.

Работа новой модели продемонстрирована в опытах по реализации главного ее достоинства – возможности «идеального» выглаживания (полирования) шероховатых поверхностей (001). Такой нанорельеф, неупорядоченный на атомном уровне, неприемлем для деталей многих высококачественных микро-/нано-приборов. Он неизбежно формируется на поверхностях деталей при их изготовлении, например, с использованием распространенных плазменных и ионных технологий [5].

Каждый из опытов включает 2 основных этапа: формирование разупорядоченной поверхности и ее полирование. Оба этапа реализуются в рамках новой модели путем «травления» кристалла с использованием специальных наборов вероятностей ($P_1 - P_{129}$). На этапе разупорядочения «образец совершенного кристалла» с ориентацией поверхности (001) подвергается «растворению» в изотропном «травителе», в наборе вероятностей которого ($P_1 - P_{129}$)_R большинство чисел имеют равные или близкие значения. В таком «растворе» формируется развитый (шероховатый) микро-/нано-рельеф поверхности. Форма деталей этого рельефа и толщина разупорядоченного слоя определяются содержанием набора вероятностей и числом удаленных атомов.

Этап полировки разупорядоченной поверхности реализуется с использованием специальных «полирующих» наборов вероятностей ($P_1 - P_{129}$)_P. Значения вероятностей в этих «анизотропных» наборах определяются в опытах по ликвидации (стравливанию) отдельных простых дефектов поверхности с последующим увеличением их числа и усложнением атомной структуры. Отыскиваются наборы значений, которые приводят к необходимому результату травления – полному удалению шероховатого слоя кристалла, имеющего любую возможную степень разупорядоченности, с

автоматической остановкой процесса при образовании кристаллографически идеальной поверхности (001). На данном этапе поиска «полирующих» наборов используется лишь два значения вероятностей: 0 и 1.

Примеры результатов моделирования процесса в одном из таких опытов показаны на рисунке 1, где **А** – шероховатая поверхность (001); **Б** – результат промежуточного полирующего травления поверхности **А**; **В** – результат финального травления поверхности **А** в том же «растворе» – идеальная поверхность (001) с поверхностными атомами типа (262). В данном «идеальном полирующем растворе» набор вероятностей $(P_1 - P_{129})_P$ имеет следующее содержание: вероятности удаления всех односвязных атомов, а также двухсвязных атомов типа (220), (230), (240), (241), (250), (251), (252) и (261) равны 1. Вероятность удаления атомов всех других типов равна нулю.

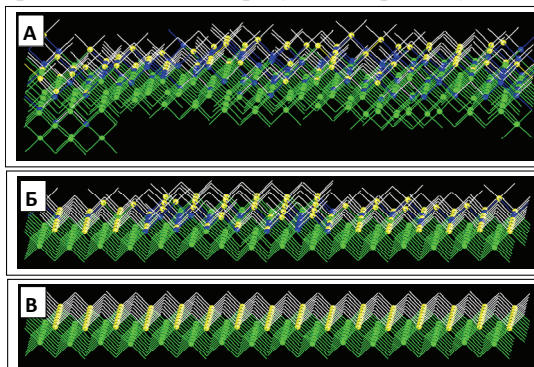


Рис. 1. Примеры результатов работы модели растворения Diamond-4 (см. текст)

Пример показывает, что для реализации идеальной химической полировки поверхности (001) кристаллов типа алмаза необходима разработка специальных анизотропных растворов. В настоящее время такие растворители для кристаллов кремния неизвестны. Состав этих растворов должен обеспечить большую активность по отношению к одним специфическим группировкам поверхностных атомов, и малую активность по отношению к другим группировкам. На конкретную атомную структуру таких кластеров указывают типы атомов, вероятности удаления которых равны 1 и 0, найденные в компьютерных экспериментах, подобных описанным выше.

Эти данные могут служить ориентиром при разработке реальных составов «идеальных полирующих растворов». В ходе такой разработки будут совершенствоваться компьютерные модели растворения кристалла, в частности, будут уточняться значения вероятностей (скоростей) удаления поверхностных атомов и структура соответствующих кластеров в элементарных актах процесса растворения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Gosalvez M. A. Atomistic methods for the simulation of evolving surfaces / M. A. Gosalvez, Y. Xing, K. Sato, R. M. Nieminen. // J. Micromechanics and Microengineering. 2008. Vol.18. 055029. (17 pp).
2. Усенко А. Е. Анизотропное растворение монокристаллического кремния вблизи края химической маски на поверхности (001). / А.Е.Усенко, А.В.Юхневич. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2009. №8. С. 64.
3. Юхневич, А. В. Моделирование химического растворения монокристаллического кремния методом Монте-Карло: сб. научных трудов 5-й Международной научной конференции «Материалы и структуры современной электроники», Минск, 10-11 октября 2012 г. / А. В. Юхневич, И. А. Майер, А. Е. Усенко, А. О. Конаков. Минск: БГУ. 2012. С.104.
4. Юхневич, А. В. К моделированию технологии изготовления кремниевых МЭМС/НЭМС приборов: Международный научно-технический сборник «Теоретическая и прикладная механика» Выпуск 28 / А. В. Юхневич, И. А. Майер, А. Е. Усенко. Минск: БНТУ. 2013. С.123.
5. Wu. B. High aspect ratio silicon etch: A review. / B. Wu, A. Kumar A., S. Pamarthy. // J. Applied Physics. 2010. Vol.108. 051101. (20 pp).